非周期系に於ける短距離秩序と非対角項のランダムネス(昭和51年度基研長期研究計画「配位相転移の研究」研究会報告)

合田, 正毅

非周期系に於ける短距離秩序と非対角項のランダムネス

新潟大学工学部　　合　田　正　毅

1）非周期系と云ってもはなはだ広い範囲の系を指しているが，ここでは次のハミルトニアンで表わされる tightly binding な描象が成り立つ範囲での結晶及不定型固体を考える事にする。

$$H = \sum_{i} |i> \alpha_i <i| + \sum_{i>j} |i> t_{ij} <j| \tag{1}$$

此のハミルトニアンは指標を適当にとる事により Weaire and Thorpe のモデルハミルトニアンも含むものとする。ここに α_i に関する乱雑さを対角項の乱雑さ（DR），t_{ij} に関する乱雑さを非対角項の乱雑さ（ODR）と呼ぶ事にする。このハミルトニアンで記述される系は相転移を起さない，という点ではハミルトニアン (1) は此の研究会には不適のものであるかもしれない。しかし (1) につき配位が短距離秩序と ODR として考慮される点では基礎的な問題を扱っていると思う。

(1) で記述される系については，DR に関しては結晶に関しかなり調べられているが ODR については定性的なものさえ多くは分っていない。不定型固体等に於ける ODR の果す役割を調べる事は大変重要な事と思われるが此処ではもっと基礎的な問題として ODR をも含む非周期系に於ける短距離秩序（又は配位）の重要性を強調する事にする。研究会では ODR をとり入れる計算方法を紹介したが話が散漫になるきらいが有るので此の報告では末尾に文献を記すのみで省略する。[2)*]

2）一次元鎖に関する Coarse grained quantity についての松田の定理

系の短距離秩序が Coarse grained quantity と密接に関係している事は松田氏により始めて理論的に示された。[1)*] 証明は最近接相互作用のみを持つ一次元鎖についてであり三重対角実対称行列に関するものであるが，此処では同じ結論が３重対角エルミート行列に関しても得られるので，後のために話を一般化して，その概要を以下に紹介する。

次のハミルトニアン

$$H_1 \sim \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1^+ & & & 0 \\ \beta_2^- & \alpha_2 & \beta_2^+ & & \\ & \beta_3^- & \ddots & \ddots & \beta_{N-1}^+ \\ 0 & & \ddots & \beta_N^- & \alpha_N \end{pmatrix} \qquad \begin{aligned} \beta_n^+ &= (\beta_{n+1}^-)^* \\ \beta_1^- &= \beta_N^+ = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

で表わされる系を考える。この系に関する retarded Green's function $\mathcal{G}_{nn'}(t)$ の Fourier 変換を次の様に定義する。

$$G_{nn'}(E) = i\int_0^{\infty} e^{iEt}\,\mathcal{G}_{nn'}(t)\,dt \tag{3}$$

$$E = \varepsilon + i\Gamma, \qquad \Gamma > 0 \tag{4}$$

この時,

$$\ell m\ G_{nn'}(\varepsilon + i\Gamma) = \frac{1}{\Pi}\int_{-\infty}^{\infty} G''_{nn'}(\varepsilon')\,\frac{\Gamma}{(\varepsilon'-\varepsilon)^2+\Gamma^2}\,d\varepsilon' \tag{5}$$

$$G''_{nn'}(\varepsilon) \equiv \lim_{\gamma\to 0_+} \ell m\ G_{nn'}(\varepsilon + i\gamma) \tag{6}$$

であり此の $G_{nn'}(E)$ に関し次の性質を持つ, effective distance $\bar{\ell} = \bar{\ell}(E)$ が存在する。

(i) $|G_{nn'}(E)| < \sqrt{\bar{\ell}}\ \mathrm{Min}\,\{|G_{nn}(E)|, |G_{n'n'}(E)|\}\cdot\exp\{-|n-n'|/2\bar{\ell}\}$

(ii) $G_{nn'}(E)$ ($|n-n'| < \ell$) の n, n′ より ℓ の範囲外にある行列要素に対する依存性は, ℓ の増加とともに $\exp(-\ell/\bar{\ell})$ で小さくなる。

(iii) $\bar{\ell}(E) \leqq \ell_0 = \mathrm{Max}_n\,(1 + |\beta_n^-|^2/\Gamma^2)$

3) 一般のハミルトニアン(1)に関する1つの表示と松田の定理の一般化

最初に norm 1 の任意の基底を考える。この時次の様に一連の基底の組を作っていくものとする。ハミルトニアン(1)はこの表示で三重対角エルミート行列となる。

$$|1)$$

$$|1) = |1)$$

$$|2) = \frac{1}{\sqrt{N_2}}\left\{(\mathbb{1} - |1)(1|)\,H|1)\right\}$$

$$|3) = \frac{1}{\sqrt{N_3}}\left\{(\mathbb{1} - |1)(1| - |2)(2|)\,H|2)\right\}$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$H \sim \begin{pmatrix} a_1 & t_1^+ & & & 0 \\ t_2^- & a_2 & t_2^+ & & \\ & t_3^- & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & t_{N-1}^+ \\ 0 & & & t_N^- & a_N \end{pmatrix} \tag{7}$$

ここにN_iは規格化因子である。この時基底 $|m)$ をもとの基底 $|n\rangle$ で展開してみる。簡単のため最近接相互作用のみを持つ二次元規則正方格子に関しいくつかの例を図示してみると図(1)のようになり，新しい基底 $|m)$ は $|1)$ からハミルトニアンのm回の演

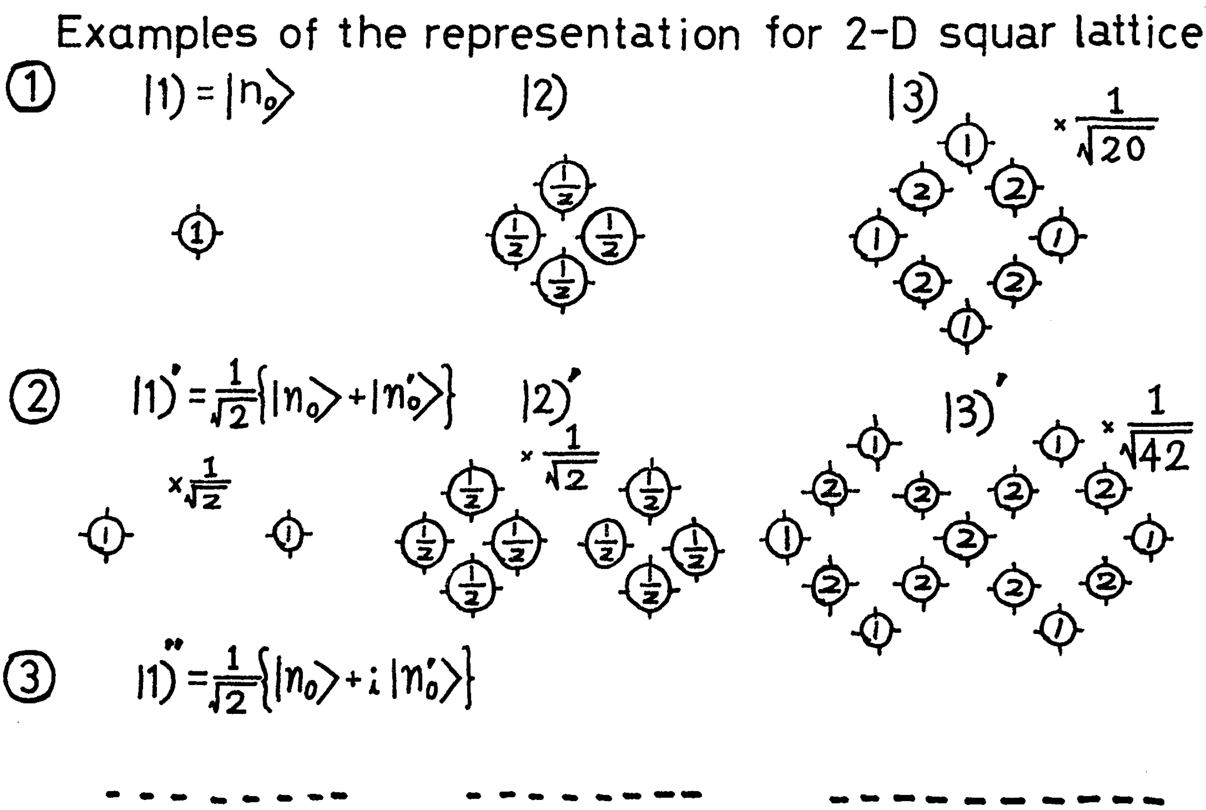

図　1

算子で到達出来る。envelope（これを“距離m”と呼ぶ事にする）より遠くには広がっていない。此の事と，

$$(1|G|1) = \langle n_0|G|n_0\rangle$$

$$'(1|G|1)' = \frac{1}{2}\{\langle n_0|G|n_0\rangle + \langle n_0|G|n_0'\rangle + \langle n_0'|G|n_0\rangle + \langle n_0'|G|n_0'\rangle\}$$

$$''(1|G|1)'' = \frac{1}{2}\{\langle n_0|G|n_0\rangle + i(\langle n_0|G|n_0'\rangle - \langle n_0'|G|n_0\rangle) + \langle n_0'|G|n_0'\rangle\} \tag{8}$$

を考慮しながら新しい表示で前節に述べた定理を適用すると，距離の概念を ℓ から「ハミルトニアンのm回の演算で到達出来る“距離”をmとする」事に変更する事により，此の“距離”mに関して松田氏がlinier chainで証明した定理がそのまま成立している事が分る。改めて書くと，（$G_{nn'} = \langle n|G|n'\rangle$。$n, n'$の“距離”$=m'$．として）

(i)* $|G_{n,n'}(E)| < \sqrt{\bar{m}}\,\mathrm{Min}\,\{|G_{nn}(E)||G_{n'n'}(E)|\}\cdot\exp\{-m'/2\bar{m}\}$

(ii)* $G_{nn'}(E)$ $(m'<m)$ のn, n'より“距離”mの範囲外にある行列要素に対する依存性は，mの増加とともに $\exp(-m/\bar{m})$ で小さくなる。

(iii)* $\bar{m}(E) \leqq m_0 = \mathrm{Max}_m\left(1 + |t_m^-|^2/\Gamma^2\right)$

である。此処に $|t_m^-|$ の有界性が問題となるが，ハミルトニアンが有界であれば，

$$\sum_m |Hlm|^2 \leqq M \equiv ||H|| \tag{9}$$

より t_m^- の上限はおさえられる。

4）得られた結論と問題点

前節までの議論によりtightly bindingなハミルトニアン(1)に関して effective distance $\bar{m}(E)$ が系の次元や構造によらず存在する事が示された。此の話は相互作用のrangeにもよらないが，相互作用のrangeが有限でないとmはもとの空間での距離というものと対応しなくなる。又ハミルトニアンが有界でも短距離相互作用でないとeffective distance $\bar{m}(E)$ はもとの空間で大きな距離に対応してしまい，物理的意味を持ちにくくなる。しかしいづれにしろ松田氏の提出したeffective distanceという概念は，系の次元や構造に

よらず，少なくとも短距離相互作用が主の有界作用素に一般の概念であることが示された。

残された問題はいくつかある。

α）最近接相互作用のみの場合につき最大配位数をZとして，$T = \mathrm{Max}_{m} |t_m^-|$ を評価してみると，

$$T \geqq Z \ \mathrm{Max}_{nn'} |t_{nn'}| + |\mathrm{Max}_{n} \ \alpha_n - \mathrm{Min}_{n} \ \alpha_n|$$

and

$$\geqq M \geqq Z \ \mathrm{Max}_{nn'} |t_{nn'}| + \mathrm{Max}_{n} |\alpha_n| \qquad (10)$$

であるが相互作用をZでスケールすると，m(E) のZ依存性が（ODが無い場合には）無くなる。此の事は今迄のいくつかの経験的事実に反するように見えるが，これはTの上限のおさえ方の甘さを意味するのか，それとも本当の事なのか？

β）いわゆるlocalizationの問題に関して，此の表示は有用であるか？

γ）long range forceが存在する場合，又もっと一般の相転移を起すようなハミルトニアンに関してはどの程度の事が云えるか？

参考文献

1) H.Matsuda Prog. Theor. Phys. Suppl. **36**(1966) 97

2) M.Goda J.Phys. **C6**(1973) 3047 M.Goda J. Phys. C. to be published